84
数理解析研究所講究録
730巻 1990年 84-95

Schrödinger方程式の解の漸近挙動

東大・教養　北田　均
(Hitoshi Kitada)

我々の問題はN-体Schrödinger方程式

(1)
$$\frac{1}{i}\frac{du}{dt}+Hu=0,\quad u(0)=f \qquad \text{in } \mathcal{H}=L^2(R^n),$$
$$(n=(N-1)\nu,\ \nu\geqq 3)$$

の解 $e^{-itH}f$ の $t\to\pm\infty$ での漸近挙動を調べることである。

ここで H は N-体 Hamiltonian で

(2)
$$H=H_0+V=H_0+\sum_\alpha V_\alpha(x_\alpha)$$
$$(H_0 \text{ は free Hamiltonian})$$

の形をしている。$\alpha=(i,j)$, $1\le i<j\le N$ は pair で、V_α は pair potential と呼ばれる：

(3)
$$V_\alpha(x_\alpha)=V_\alpha(r_i-r_j) \qquad (r_i, r_j\in R^\nu)$$

r_i は i 番目の粒子の位置 vector である。i 番目の粒子の質量を $m_i>0$ と書く。

$a=\{C_1,\cdots,C_k\}$ が $\{1,\cdots,N\}$ の cluster 分解とは、

(4) $\bigcup_{l=1}^{k} C_l = \{1,\cdots,N\}$, $\quad C_i \cap C_j = \phi \ (i \neq j)$, $\ C_i \neq \phi$

なること。R^n の Jacobi 座標系 $x=(x_1,\cdots,x_{N-1})$ は

(5) $$x_{j+1} = r_{j+1} - \Big(\sum_{i\le j} m_i\Big)^{-1}\Big(\sum_{i\le j} m_i r_i\Big) \quad (j=1,\cdots,N-1)$$

と定義される。

cluster 分解 a に対応する Jacobi 座標 $x=(y_a, x^a)$ は、まず各 cluster C_l 内の Jacobi 座標 $x^{(C_l)}=(x_1^{(C_l)},\cdots,x^{(C_l)}_{|C_l|-1})$ ($|C_l|$ は set C_l の元の個数) をとり、$x^a=(x^{(C_1)},\cdots,x^{(C_{|a|})})$ とする。次に各 cluster C_l の重心を一点とみなし、この重心間の Jacobi 座標をとり、それを $y_a=(y_1,\cdots,y_{|a|-1})$ として得られる。この時 H_0 は

(6) $$H_0 = -\frac{1}{2}\left(\sum_{l=1}^{|a|-1}\frac{1}{M_l}\Delta_{y_l} + \sum_{l=1}^{|a|}\sum_{i=1}^{|C_l|-1}\frac{1}{\mu_i}\Delta_{x_i^{(C_l)}}\right)$$

と表わされる。但し、M_l, μ_i は reduced mass.

$R^n = R^{\nu(|a|-1)}_{y_a} \times R^{\nu(N-|a|)}_{x^a}$ の内積として、

(7) $$\langle (y_a, x^a), (\tilde{y}_a, \tilde{x}^a)\rangle = \sum_{l=1}^{|a|-1} M_l y_l\cdot\tilde{y}_l + \sum_{l=1}^{|a|}\sum_{i=1}^{|C_l|-1}\mu_i x_i^{(C_l)}\cdot\tilde{x}_i^{(C_l)}$$

をとる。$x=(y_a,x^a)$ に conjugate な運動量を

(8) $$q = (q_a, p^a)$$
$$\begin{cases} q_a = (M_1^{-1} D_{y_1}, \cdots, M_{|a|-1}^{-1} D_{y_{|a|-1}}) \\ p^a = (\mu_1^{-1} D_{x_1^{(C_1)}}, \cdots, \mu_{|C_{|a|}|-1}^{-1} D_{x^{(C_{|a|})}_{|C_{|a|}|-1}}) \end{cases}$$

と定義すると、H_0 は次のようになる:

(9) $$H_0 = -\frac{1}{2}\langle (q_a, p^a), (q_a, p^a)\rangle.$$

cluster 分解 a に対し、

(10) $$A^a = \frac{1}{2}(\langle x^a, p^a\rangle + \langle p^a, x^a\rangle) = \frac{1}{2}(x^a\cdot D^a + D^a\cdot x^a)$$

とおく。$|a|=1$ のとき、A^a を A と書く。A^a は $\mathcal{H}^a \equiv L^2(R^{(N-|a|)\nu}_{x^a})$ の selfadjoint operator で、$i[H_0, A] = 2H_0$ をみたす。

cluster 分解 a の各 cluster C_l, C_m の重心を結ぶ vectors を z_k, $k=1,\dots,k_a$, $\left(k_a = \binom{k}{2},\ k=|a|\right)$ と表わす。

全 Hamiltonian H は

(11) $$H = H_0 + V = H_0 + \sum_\alpha V_\alpha = H^a + T_a + I_a$$
$$\equiv \Big(H_0^a + \sum_{\alpha\le a} V_\alpha\Big) + T_a + I_a, \quad I_a = \sum_{\sim(\alpha\le a)} V_\alpha$$

と分解される。但し、$\alpha\le a$ は pair $\alpha=(i,j)$ の i,j が a の同一の cluster に属することを表し、$\sim(\alpha\le a)$ はその否定とする。

T_a は cluster 間の free energy, H_0^a は cluster 内の free energy である。

P_a を H^a の eigenprojection とする。$|a|=N$ のときは、$P_a = I$ とする。

Lemma. $0<\Lambda_0<\infty$ とする。$\Lambda_0 \gg \theta_2 \gg \theta_3 \gg \cdots \gg \theta_{N-1} > 0$ なる θ_j に対し、

(12) $$\tilde{j}_a(x) = \phi(|x_a|^2 < 2\theta_{|a|})^{1/2} \qquad (|a|=2)$$
$$= \Big\{\phi(|x_a|^2<2\theta_{|a|}) \prod_{l=2}^{|a|-1}\Big(1 - \sum_{|c|=l,\, a\le c} \phi(|x_c|^2 < 2\theta_{|c|})\Big)\Big\}^{1/2} \quad (3\le|a|\le N)$$

とおくと、

(13) $$\sum_{2\le|a|\le N} \tilde{j}_a(x)^2 = 1 \quad \text{on } \{x \in R^n \,/\, |x|^2 > \Lambda_0\}.$$

従って、$r_0 >> \rho_2 >> \sigma_2 >> \rho_3 >> \sigma_3 >> \cdots >> \sigma_{N-1} >> \rho_N > 0$

なる ρ_j に対し、$|x|^2 > r_0$ の時

(14) $\displaystyle\sum_{2\le|a|\le N} \tilde{j}_a(x)^2 \prod_{k=1}^{k_a} \phi(|x_k|^2 > \rho_{|a|}) \overset{def}{\equiv} \sum_{2\le|a|\le N} j_a(x)^2 = 1.$

但し、$\phi(\lambda>\rho)$ は $\{\lambda \mid \lambda>\rho\}$ の滑らかな特性関数。

これは Sigal-Soffer [2] の Sect. 5 の phase space での1の分解を configuration space で行ったものに過ぎない。

結果を述べるために仮定をおく：

仮定I. $V_\alpha(x_\alpha)\in C^1(R^\nu)$ で、

$$|V_\alpha(x_\alpha)| + |x_\alpha\cdot\nabla_{x_\alpha} V_\alpha(x_\alpha)| \to 0 \quad (|x_\alpha|\to\infty).$$

仮定II. i) $1\le|a|\le N-1$ に対し、$P_a=\sum_{i=1}^{L_a} P_a^i$, $P_a^i f=(f,\varphi_a^i)\varphi_a^i$

$(0\le L_a<\infty)$ $\quad \|\varphi_a^i\|=1$

ii) $\||x^a|P_a\|<\infty$, $2\le|a|\le N-1$.

<u>定理.</u> $f\in\mathcal{D}(\langle x\rangle)\cap\mathcal{D}(H)$ に対し、$\exists t_n\to\pm\infty$ なる列があって、

$$\lim_{\substack{\rho_j/\sigma_j\to\infty \\ \rho_N\to\infty}} \limsup_{n\to\infty} \sum_{2\le|a|\le N} \left\|\left(\frac{y_a}{t_n} - z_a\right) j_a(x) e^{-it_nH} f\right\|^2 = 0.$$

この定理は状態 $j_a e^{-it_nH} f$ 上では運動量と座標が古典力学的な関係を漸近的に満たすことを示す。これは Enss [1] の結果の一変形であり、筆者が1984年に予想していたものである。

以下定理の証明： $t_n \to +\infty$ の時のみ考える。

$$(1) = \sum_{2\le|a|\le N} \left\| \left(\frac{y_a}{t} - q_a\right) j_a'(x)\, e^{-itH} f \right\|^2$$

とおく。このとき $\exists T_n \to \infty$, $\exists s_n \to \infty$ なる列に対し、

$$\frac{1}{T_n}\int_{s_n}^{s_n+T_n} (1)\, dt \longrightarrow 0 \quad (n\to\infty)$$

を言えば十分。この式は $s, T > 0$ に対して、

$$\frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} (1)\, dt$$

$$= \sum_{2\le|a|\le N} \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} j_a' \left(\frac{y_a^2}{t^2} - \frac{1}{t}(\langle y_a, q_a\rangle + \langle q_a, y_a\rangle) + 2T_a\right) j_a' \times e^{-itH} f, f\right) dt$$

となる。$y_a^2 + (x^a)^2 = x^2$, $\frac{1}{2}(\langle y_a, q_a\rangle + \langle q_a, y_a\rangle) + A^a = A$ に注意して、j_a' の support の性質より、

$$\frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} (1)\, dt = \sum_{2\le|a|\le N} \left\{ \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} j_a' \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + 2T_a\right) j_a' e^{-itH} f, f\right) dt + O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s}\right)\right\}$$

$$\equiv (2) + ① , \quad ① = \sum_{2\le|a|\le N} O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s}\right)$$

となる。$[j_a', \frac{A}{t}] = O\left(\frac{1}{t\theta_{|a|}}\right)$, $[j_a', T_a] = O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}}\right)$ ゆえ、

$$(2) = \sum \left\{ \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + 2T_a\right) j_a'^2 e^{-itH} f, f\right) dt + O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}}\right)\right\}$$

$$= \sum \left\{ \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + i[H, A]\right) j_a'^2 e^{-itH} f, f\right) dt + O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}}\right) + \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} (i[H^a, A^a] + i[I_a, A]) e^{-itH} f, f\right) dt \right\}$$

ここで $\|i[\mathcal{I}_a, A]\, j_a'^2 (H+i)^{-1}\| = o_{\theta(a)}(1)$ $(\to 0 \text{ as } \theta(a)\to\infty)$ ゆえ,

$\sum_{2\le|a|\le N} j_a'^2 = 1$ と合わせて,

$$
\begin{aligned}
(2) &= \frac{1}{T}\int_\sigma^{\sigma+T} (e^{itH}J(t)e^{-itH}f, f)\,dt \\
&\quad + \sum_{2\le|a|\le N}\left\{\frac{1}{T}\int_\sigma^{\sigma+T}(e^{itH}\, i[H^a, A^a]\, j_a'^2 e^{-itH} f, f)\,dt + o_{\theta(a)}(1)\right\} \\
&\equiv (4) + (5) + \overset{③}{\sum} o_{\theta(a)}(1).
\end{aligned}
$$

まず(4)を考える: $G(t) = e^{itH}\, i[H,A]\, e^{-itH} = \frac{d}{dt} e^{itH}Ae^{-itH}$

(これは $\mathcal{D}(H)$ 上 t に付き一様有界) とおき,

$$H(t) = \frac{1}{t^2}\int_0^t \tau G(\tau)\,d\tau \quad (\text{これも } \mathcal{D}(H) \text{ 上一様有界})$$

とする。このとき, 部分積分より,

$$
\begin{aligned}
tH'(t) &= G(t) - \frac{2}{t^2}\int_0^t \tau G(\tau)\,d\tau \\
&= G(t) - \frac{2}{t^2}\left\{\left[\tau\int^\tau G(\sigma)\,d\sigma\right]_0^t - \int_0^t\int^\tau G(\sigma)\,d\sigma\,d\tau\right\} \\
&= G(t) - \frac{2}{t}\left\{e^{itH}Ae^{-itH} - A\right\} + \frac{2}{t^2}\int_0^t e^{i\tau H}Ae^{-i\tau H}\,d\tau \\
&= G(t) - e^{itH}\frac{2A}{t}e^{-itH} + \frac{2A}{t} + \frac{1}{t^2}\left(e^{itH}x^2e^{-itH} - x^2\right) \\
&= e^{itH}J(t)e^{-itH} + \left(\frac{2A}{t} - \frac{x^2}{t^2}\right).
\end{aligned}
$$

よって,

$$e^{itH}J(t)e^{-itH} = tH'(t) + \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t}\right).$$

ゆえに,

$$
\begin{aligned}
(4) &= \frac{1}{T}\int_\sigma^{\sigma+T} t(H'(t)f, f)\,dt + \frac{1}{T}\int_\sigma^{\sigma+T}\left(\left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t}\right)f, f\right)dt \\
&= (4)' + O\left(\frac{1}{\sigma}\right).
\end{aligned}
$$

ここで Enss [ ] による Lemma が成り立つ;

Lemma. $h(t) \in C^1([0,\infty))$, bounded, $\lim_{t\to\infty}|h'(t)| = 0$

$\Rightarrow \forall T>0,\ \exists s_n \to \infty$ s.t.

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{T}\int_{s_n}^{s_n+T} t\,h'(t)\,dt = 0.$$

これより, $\exists T_n \to \infty,\ \exists s_n \to \infty$ s.t.

$$④ \equiv (4)\Big|_{T=T_n,\ s=s_n} \longrightarrow 0 \quad (n\to\infty)$$

がいえる。

次に(5)を考える;

$$(5) = \sum_{2\le|a|\le N} \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-itH} f, f\right) dt,$$

$\delta > 0$; given に対し, $s(t) = t - m\delta$ for $m\delta + s \le t < (m+1)\delta + s$ $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ とおく。すると, $m_0 = [T/\delta]$ (Gauss 記号) とおくとき,

$$\frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} \left(e^{itH} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-itH} f, f\right) dt$$

$$= \frac{1}{T}\left\{\int_{s}^{\delta+s} + \int_{m_0\delta}^{s+T} + \sum_{m=1}^{m_0-1}\int_{m\delta+s}^{(m+1)\delta+s}\right\}\left(e^{is(t)H} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-is(t)H} \right.$$

$$\left.\times\, e^{-im\delta H} f,\ e^{-im\delta H} f\right) dt$$

$$= O\left(\frac{\delta}{T}\right) + \frac{1}{m_0}\sum_{m=1}^{m_0-1}\frac{1}{\delta}\int_{s}^{s+\delta}\left(e^{i\sigma H} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-i\sigma H} f_m, f_m\right) d$$

となる。但し, $f_m = e^{-im\delta H} f$. これを

$$\equiv ⑤ + \frac{1}{m_0}\sum_{m=1}^{m_0-1} (6)$$

と書く。

(6) は

$$(6) = \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} \left(e^{is'H} i[H^a, A^a] j_a'^2 e^{-is'H} f_m, f_m \right) ds'$$

であるが、固定した S に対し、$s \leq s' \leq s+S$ なる s' について一様に、

$$e^{is'H} = e^{is'H_a} + O^S_{\rho_{|a|}}(1)$$

但し $O^S_\rho(1) \to 0$ (as $\rho \to \infty$ for each fixed $S>0$)

がいえるので、

$$(6) = \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} \left(e^{is'H_a} i[H^a, A^a] j_a'^2 e^{-is'H_a} f_m, f_m \right) ds' + O^S_{\rho_{|a|}}(1)$$

$$\equiv (7) + ⑥.$$

ここで次が成りたつ：

Lemma. $B(s)$ を s について norm 連続、一様有界 operator とする。

i) $\left\| \frac{1}{S}\int_0^S B(s) \phi(|x^a|<\theta) (I-P_a) e^{-isH^a} (H^a+i)^{-1} ds \right\| \to 0$ (as $S\to\infty$)

(RAGE-theorem)

ii) 仮定 II-ii) より、$\| \phi(|x^a|>\theta) P_a \| \to 0$ (as $\theta\to\infty$).

iii) i), ii) より、$\forall s>0$ について一様に

$$\left\| \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} B(s') \left(\phi(|x^a|<\theta) - P_a \right) e^{-is'H^a} (H^a+i)^{-1} ds' \right\|$$

$$= O_\theta(1) + O^\theta_S(1).$$

8

よって

$$(7) = \left(\frac{1}{S} \int_{s}^{s+S} e^{is'H^a} i[H^a, A^a] j_a^2 e^{-is'H^a} (H^a+i)^{-1} ds' \times \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right).$$

ここで $3 \leq |a| \leq N$ のときの $j_a(x)$ の定義式の第2の因子と，$H_a = H^a + T_a$ の中の T_a の commutator $\times (T_a+i)^{-1}$ の operator norm の order は $O_{\rho_{|a|}}(1)$ なので，fixed $S>0$ に対し，

$$e^{is'T_a}\{j_a(x) の第2因子\} e^{-is'T_a} = I + O^S_{\rho_{|a|}}(1) \quad (s \leq s' \leq s+S)$$

となる。j_a の第1因子は T_a と可換に注意すれば，上の Lemma の前により，

$$(7) = \left(\frac{1}{S} \int_{s}^{s+S} e^{is'H^a} i[H^a, A^a] \{j_a^2 の第1因子\} e^{-is'H^a} (H^a+i)^{-1} ds' \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right)$$

$$+ O^S_{\rho_{|a|}}(1) \ (\equiv ⑦ とおく)$$

$$= \left(\frac{1}{S} \int_{s}^{s+S} e^{is'H^a} i[H^a, A^a] P_a e^{-is'H^a} (H^a+i)^{-1} ds' \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right)$$

$$+ \underbrace{O_{\theta_{|a|}}(1)}_{\text{(}⑧} + \underbrace{O_S^{\theta_{|a|}}(1)}_{⑨ \text{ とおく)}} + ⑦,$$

ところが，$H^a P_a^i = \lambda_a^i P_a^i$ とすれば，

$$\frac{1}{S} \int_{s}^{s+S} e^{is'H^a} i[H^a, A^a] P_a^i e^{-is'H^a} (H^a+i)^{-1} ds'$$

$$= \frac{1}{S} \int_{s}^{s+S} e^{is'(H^a-\lambda_a^i)} i(H^a-\lambda_a^i) A^a P_a^i \times (H^a+i)^{-1} ds'$$

$$= \frac{1}{S} \left(e^{i(s+S)(H^a-\lambda_a^i)} - e^{is(H^a-\lambda_a^i)} \right) A^a P_a^i (H^a+i)^{-1}.$$

$A^a p_a^i (H^a+i)^{-1}$ は仮定II-ii)より bounded operator なので、これは $S \to \infty$ のとき、operator norm で $\to 0$。よって

$$(7) = O\left(\frac{1}{S}\right) + ⑦ + ⑧ + ⑨ \equiv ⑩ + ⑦ + ⑧ + ⑨.$$

以上まとめると、

$$\frac{1}{T_n}\int_{s_n}^{s_n+T_n} (1)\, dt$$

$$= \sum_{2\le|a|\le N}\Bigg\{\overset{①}{O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s_n}\right)} + \overset{③}{o_{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{④}{o_n(1)}$$

$$+ \overset{⑤}{O\left(\frac{S}{T_n}\right)} + \overset{⑥}{o^S_{\rho_{|a|}}(1)} + \overset{⑦}{o^S_{\rho_{|a|}}(1)}$$

$$+ \overset{⑧}{o_{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{⑨}{o_S^{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{⑩}{O\left(\frac{1}{S}\right)}\Bigg\}.$$

$\forall \varepsilon > 0$ given とする。このとき、

1° $\exists \theta^0_{|a|} > 1$, $\forall \theta_{|a|} > \theta^0_{|a|}$: ③ + ⑧ $< \varepsilon$.

2° $\forall \theta_{|a|} > \theta^0_{|a|}$, $\exists S > 1$: ⑨ + ⑩ $< \varepsilon$.

3° $\exists \rho^0_{|a|} > \theta_{|a|}$, $\forall \rho_{|a|} > \rho^0_{|a|}$: ⑥ + ⑦ $< \varepsilon$.

4° $\exists n_0 > 1$, $\forall n > n_0$: ① + ④ + ⑤ $< \varepsilon$.

とできるので、定理がいえた。 □

以上の結果，または，Enss[1]の結果を使うと下の仮定IIIを付け加えたとき，N-体波動作用素

$$W_a^{\pm} = \underset{t\to\pm\infty}{s\text{-}\lim}\, e^{itH} e^{-itH_a} P_a$$

の完全性：

$$\bigoplus_{2\le|a|\le N} \mathcal{R}(W_a^{\pm}) = \mathcal{H}^{c}(H) = \mathcal{H}^{ac}(H)$$

がいえる。但し，$\mathcal{H}^{c}(H)$，$\mathcal{H}^{ac}(H)$ は H の連続，及び，絶対連続部分空間．

仮定III．　$V_\alpha(x_\alpha)$ は $C^2(R^\nu)$-関数で，$\exists\varepsilon>0$，$\exists C_0>0$ に対し，

$$|V_\alpha(x_\alpha)| \le C_0(1+|x_\alpha|)^{-1-\varepsilon},\quad |(x_\alpha\cdot D_{x_\alpha})^2 V_\alpha(x_\alpha)| \le C_0,$$

(※)　$x_\alpha\cdot D_{x_\alpha} V_\alpha(x_\alpha) + 2V_\alpha(x_\alpha) \ge 0$.

この研究をした初期の段階では(※)はなしで完全性が成り立つことを証明できたと思ったが，W. Hunziker の学生 Gian Graf，及び，中村周氏より，その時の key Lemma は成り立たないのではないかとの疑問がよせられた。現段階で確実にいえるのは，(※)の条件をつければ完全性は成り立つということである。

文献

[1] V. Enss, Introduction to asymptotic observables for multi-particle quantum scattering, In Schrödinger Operators, Aarhus 1985, ed. E. Balslev, Lect. Notes in Math., 1218, Springer-Verlag, 1986, pp. 61-92.

[2] I. M. Sigal, A. Soffer, The N-particle scattering problem: Asymptotic completeness for short-range systems, Ann. Math., 126 (1987), 35-108.